ISSN 0868–5886 НАУЧНОЕ ПРИБОРОСТРОЕНИЕ, 2013, том 23, № 4, с. 91–94

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

УДК 533.6.011.12

© Б. П. Шарфарец, Е. Б. Шарфарец

НЕКОТОРЫЕ ОСОБЕННОСТИ МОДЕЛИРОВАНИЯ МИКРОФЛЮИДНЫХ ПРОЦЕССОВ

С целью преодоления вычислительных трудностей рассматривается замена методом подобия исходной физической задачи течения вязкой сжимаемой жидкости в капилляре моделью, позволяющей избежать этих трудностей. Для этого рассматривается возможность сведения общего уравнения Навье—Стокса к уравнению для вязкой несжимаемой жидкости. Далее используется упрощенное моделирование с одним безразмерным критерием подобия — числом Рейнольдса. Рассматриваются детали моделирования.

Кл. сл.: теория подобия, число Рейнольдса, уравнение Навье—Стокса, несжимаемая вязкая жидкость

ВВЕДЕНИЕ

При расчете микрофлюидных процессов, описываемых, в частности, уравнением Навье—Стокса, возникают некоторые трудности вычислительного характера, связанные с выбором сетки метода конечных элементов из-за малого отношения радиуса капилляра к его длине. Эти сложности могут быть ослаблены с помощью теории подобия [1], сводящей изучение исходной модели к изучению подобной модели, в которой эти трудности отсутствуют. В случае моделирования течений вязких жидкостей наиболее известно использование уравнения Навье—Стокса для несжимаемой жидкости по той причине, что в этом случае можно обойтись единственным критерием подобия, равным безразмерному числу Рейнольдса Re [1, 2].

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Целью работы является замена исходной модели подобной ей моделью, позволяющей обойти трудности численного решения задачи. Для этого необходимо привести ограничения, при которых можно свести исходное общее уравнение Навье—Стокса к уравнению для несжимаемой вязкой жидкости, а далее воспользоваться простейшим случаем подобного моделирования при наличии только одного критерия подобия — числа Рейнольдса и остановиться на технике для соответствующего моделирования с целью проектирования приемлемой модели.

РЕШЕНИЕ ПРОБЛЕМЫ

Рассмотрим уравнение Навье—Стокса для сжимаемой жидкости [2, 3]

$$\rho\left(\frac{\partial v}{\partial t}+(\mathbf{v}\cdot\nabla)\mathbf{v}\right)=-\nabla p+\eta\Delta\mathbf{v}+\left(\varsigma+\frac{\eta}{3}\right)\nabla\nabla\cdot\mathbf{v}. \quad (1)$$

Здесь ρ, p, $\mathbf{v}$, — плотность, давление и вектор скорости в жидкости; η и ς — сдвиговая и объемная (вторая) вязкость. Как известно [2], при некоторых условиях на переменные течения жидкость можно считать несжимаемой, что математически эквивалентно условию $\nabla\cdot\mathbf{v}=0$. Тогда (1) преобразуется к уравнению Навье—Стокса для несжимаемой жидкости

$$\rho\left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t}+(\mathbf{v}\cdot\nabla)\mathbf{v}\right)=-\nabla p+\eta\Delta\mathbf{v}. \quad (2)$$

Далее приведем условия, при выполнении которых жидкость можно считать несжимаемой, что формально означает выполнение неравенства

$$\frac{\Delta\rho}{\rho}<<1,$$

где $\Delta\rho$ — вариации изменения плотности жидкости. Сошлемся на работу [2]. При стационарном движении достаточным условием выполнения предыдущего неравенства является [2, с. 41] малое отношение амплитуды скорости движения жидкости $|\mathbf{v}|$ к скорости звука c (малость числа Маха M)

$$|\mathbf{v}|<<c\text{, или } \mathrm{M}<<1.$$

При нестационарном движении необходимо выполнение еще одного условия [2, с. 41–42]. Пусть τ и l — величины порядка промежутков времени и расстояний, на которых скорость жидкости испытывает заметное изменение (при периодическом процессе за τ принимается период).

Тогда это условие имеет вид

$$\tau >> \frac{l}{c}.$$

Наконец, при учете теплопроводности жидкости, для того чтобы можно было считать плотность постоянной, необходимо помимо выписанных условий, чтобы имеющиеся в жидкости абсолютные перепады температур были достаточно малы [2, с. 277].

Следуя [4, с. 25, 26], приведем (2) к безразмерному виду. Для этого принимаются следующие преобразования всех функций, входящих в (2), таким образом, чтобы они стали произведением размерных множителей на безразмерные переменные. Начнем с координат и вектора скорости:

$$\mathbf{r} = (x, y, z) = L_0 \tilde{\mathbf{r}} = L_0 \cdot (\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}), \qquad (3)$$

$$\mathbf{v} = V_0 \tilde{\mathbf{v}}. \qquad (4)$$

Здесь коэффициенты L_0 и V_0 имеют соответствующие размерности

$$[L_0] = \text{м}, \quad [V_0] = \text{м/с}.$$

Введенные масштабы длины L_0 и скорости V_0 фиксируют шкалы времени и давления. Для времени выбор масштабного множителя очевиден

$$t = \frac{L_0}{V_0}\tilde{t} = T_0 \tilde{t}, \qquad [T_0] = \text{с}. \qquad (5)$$

Для давления несколько сложнее. В [4] отмечается, что через параметры задачи размерность давления выражается двояко: либо так

$$p = \frac{\eta V_0}{L_0}\tilde{p} = P_0 \tilde{p}, \quad [P_0] = \left[\frac{\eta V_0}{L_0}\right] = \text{Па} = \frac{\text{Н}}{\text{м}^2}, \qquad (6)$$

либо так

$$p = \rho V_0^2 \tilde{p} = P_0 \tilde{p}, \quad [P_0] = \left[\rho V_0^2\right] = \text{Па} = \frac{\text{Н}}{\text{м}^2}. \qquad (7)$$

Вариант (6) принимается для медленных (куда и относятся микрофлюидные течения), а вариант (7) для быстрых течений. В нашем случае остановимся на варианте (6) микрофлюидных течений.

После подстановки (3)–(6) в уравнение (2) и учета преобразования дифференциальных операторов $\frac{\partial}{\partial t} = \frac{1}{T_0}\frac{\partial}{\partial \tilde{t}}$, $\nabla = \frac{1}{L_0}\tilde{\nabla}$ получается следующее уравнение:

$$\rho\left(\frac{V_0}{T_0}\frac{\partial \tilde{\mathbf{v}}}{\partial \tilde{t}} + \frac{V_0^2}{L_0}\left(\tilde{\mathbf{v}} \cdot \tilde{\nabla}\right)\tilde{\mathbf{v}}\right) = -\frac{P_0}{L_0}\tilde{\nabla}\tilde{p} + \frac{\eta V_0}{L_0^2}\tilde{\nabla}^2 \tilde{\mathbf{v}}. \qquad (8)$$

Естественно, в (8) все коэффициенты при безразмерных переменных имеют одинаковую размерность. После деления обеих частей (8) на величину

$$\frac{P_0}{L_0} = \frac{\eta V_0}{L_0^2},$$

получается безразмерное уравнение [4, с. 26]

$$\mathrm{Re}\left(\frac{\partial \tilde{\mathbf{v}}}{\partial \tilde{t}} + \left(\tilde{\mathbf{v}} \cdot \tilde{\nabla}\right)\tilde{\mathbf{v}}\right) = -\tilde{\nabla}\tilde{p} + \tilde{\nabla}^2 \tilde{\mathbf{v}}. \qquad (9)$$

Здесь безразмерное число Рейнольдса Re определяется так:

$$\mathrm{Re} = \frac{\rho L_0 V_0}{\eta}. \qquad (10)$$

Замечание. При принятии равенства (7), т. е. $P_0 = \rho V_0^2$ уравнение (9) преобразуется к уравнению [5, с. 272]

$$\frac{\partial \tilde{\mathbf{v}}}{\partial \tilde{t}} + \left(\tilde{\mathbf{v}} \cdot \tilde{\nabla}\right)\tilde{\mathbf{v}} = -\tilde{\nabla}\tilde{p} + \frac{1}{\mathrm{Re}}\tilde{\nabla}^2 \tilde{\mathbf{v}}. \qquad (9а)$$

Из сравнения (9) и (9а) видно, что при малых числах Рейнольдса действительно нужно пренебрегать инерционным, а при больших числах Рейнольдса — вязким членом уравнения.

Ценность уравнений (9), (9а) для моделирования соответствующих течений трудно переоценить. Пусть рассматриваются две модели с соответствующими преобразованиями (3)–(6) для каждой из них и характеризующими числами Рейнольдса Re_1 и Re_2. Тогда каждый процесс опишется соответственно уравнением

$$\mathrm{Re}_i\left(\frac{\partial \tilde{\mathbf{v}}}{\partial \tilde{t}} + \left(\tilde{\mathbf{v}} \cdot \tilde{\nabla}\right)\tilde{\mathbf{v}}\right) = -\tilde{\nabla}\tilde{p} + \tilde{\nabla}^2 \tilde{\mathbf{v}}, \quad i = 1, 2. \qquad (11)$$

При равенстве чисел Рейнольдса $\mathrm{Re}_1 = \mathrm{Re}_2$ уравнения (11) неразличимы. Степени свободы вариации процессов скрыты в числе Рейнольдса (10), в котором четыре параметра: плотность ρ, характерный размер L_0, характерная скорость V_0 и сдвиговая вязкость η, — главное, сохранить постоянство числа Рейнольдса $\mathrm{Re} = \mathrm{const}$. Например, два процесса подобны, если у одного из них плотность и вязкость вдвое больше, чем у второго и т. д.

Поясним технику работы описанного принципа подобия, где в рамках модели (11) фигурирует только одна безразмерная постоянная — число Рейнольдса Re. Пусть, при $\mathrm{Re} = \mathrm{const}$ выбрана модельная задача с размерными коэффициентами L_{0_1} и V_{0_1}. Тогда, согласно [2, с. 88], поле вектора скоростей в этой модели определяется выражением

$$\mathbf{v}_1 = V_{0_1}\mathbf{f}'\left(\frac{\mathbf{r}}{L_{0_1}}, \mathrm{Re}\right). \tag{12}$$

Здесь $\mathbf{f}'(\ )$ — функция, выражающая $\tilde{\mathbf{v}}$ из уравнения (11), остающаяся, естественно, инвариантной при $\mathrm{Re} = \mathrm{const}$ (напомним, что, по определению, $\dfrac{\mathbf{v}_1}{V_{0_1}} = \tilde{\mathbf{v}}$, $\dfrac{\mathbf{r}}{L_{0_1}} = \tilde{\mathbf{r}}$).

Для моделируемой задачи с параметрами L_{0_2} и V_{0_2} поле вектора скоростей определяется подобным выражением

$$\mathbf{v}_2 = V_{0_2}\mathbf{f}'\left(\frac{\mathbf{r}}{L_{0_2}}, \mathrm{Re}\right). \tag{13}$$

Поделив выражение (12) на (13), получаем пропорцию $\dfrac{\mathbf{v}_1}{V_{0_1}} = \dfrac{\mathbf{v}_2}{V_{0_2}}$, из которой определяется поле скоростей моделируемой задачи

$$\mathbf{v}_2 = \frac{V_{0_2}}{V_{0_1}}\mathbf{v}_1. \tag{14}$$

Аналогичную формулу можно записать для определения давления в жидкости. Пусть, в модели и в моделируемом процессе давление p_1, p_2 определяется выражением [2, с. 88]

$$p_i = \frac{\eta_i V_{0_i}}{L_{0_i}} f''\left(\frac{\mathbf{r}}{L_{0_i}}, \mathrm{Re}\right), \quad i = 1, 2. \tag{15}$$

Здесь в отличие от [2] размерный коэффициент в (15) взят в виде (6), а не (7). Функция $f''(\ )$ выражает поле безразмерного давления $\tilde{p}$ из уравнения (11) и также является инвариантной при $\mathrm{Re} = \mathrm{const}$. Из (15) окончательно получаем

$$p_2 = p_1 \frac{L_{0_1}}{L_{0_2}} \frac{\eta_2 V_{0_2}}{\eta_1 V_{0_1}}. \tag{16}$$

Еще раз подчеркнем, что при моделировании вследствие постоянства числа Рейнольдса Re из (10) должно выполняться условие

$$\frac{\rho_1 L_{0_1} V_{0_1}}{\eta_1} = \frac{\rho_2 L_{0_2} V_{0_2}}{\eta_2}. \tag{17}$$

Отметим также, что в выражениях (14) и (16) стоящие справа поля и коэффициенты должны быть известны.

Теперь, решая поставленную в работе задачу, можно выбрать модель с параметром L_{0_1} с нужным масштабом, к примеру в α раз большим ($L_{0_1} = \alpha L_{0_2}$), чем в оригинале. Этого можно достичь множественным образом, варьируя один параметр модели и оставляя другие постоянными. Например, через плотность $\rho_1 = \dfrac{1}{\alpha}\rho_2$, либо через сдвиговую вязкость модели $\eta_1 = \alpha\eta_2$. Можно варьировать два, три или все четыре параметра модели, оставляя в (10) и (17) число Рейнольдса постоянным и равным числу Рейнольдса моделируемого объекта.*)

Выражение (9) можно упрощать в зависимости от величины числа Рейнольдса. Очевидно, что при малых числах Рейнольдса $\mathrm{Re} \ll 1$ левой частью в (9) можно пренебречь, после чего приходим к стационарному линейному уравнению Стокса

$$\tilde{\nabla}^2\tilde{\mathbf{v}} = \tilde{\nabla}\tilde{p}.$$

Либо, если учесть временну́ю производную, но пренебречь малым в этом случае нелинейным членом $\left(\tilde{\mathbf{v}}\cdot\tilde{\nabla}\right)\tilde{\mathbf{v}}$, приходим к нестационарному линейному уравнению Стокса

$$\mathrm{Re}\frac{\partial\tilde{\mathbf{v}}}{\partial\tilde{t}} = -\tilde{\nabla}\tilde{p} + \tilde{\nabla}^2\tilde{\mathbf{v}}.$$

При больших числах Рейнольдса уравнение (9а) можно свести к уравнению Эйлера, пренебрегая вязким членом:

$$\frac{\partial\tilde{\mathbf{v}}}{\partial\tilde{t}} + \left(\tilde{\mathbf{v}}\cdot\tilde{\nabla}\right)\tilde{\mathbf{v}} = -\tilde{\nabla}\tilde{p}.$$

Выше были приведены методы теории подобия применительно к несжимаемой вязкой жидкости,

*) Отметим, что отличием математического моделирования от физического является то, что в физике параметры ρ и η не являются независимыми (их отношение $\nu = \dfrac{\eta}{\rho}$ — кинематическая вязкость — совершенно конкретная величина для различных жидкостей). В математическом же моделировании эти параметры можно полагать независимыми.

когда задача сводилась к использованию единственного безразмерного критерия подобия — числа Рейнольдса. Однако в механике жидкости зачастую присутствует ситуация, когда модель описывается двумя и более безразмерными критериями подобия [1, 2]. Так, в случае нестационарного движения жидкости, ее кроме уже приведенных параметров L_0, V_0, ρ и η можно характеризовать еще значением какого-либо характерного для этого движения интервала времени τ. При колебательном характере процесса этим временем может являться период колебаний. Из пяти приведенных величин можно составить не один, а два безразмерных критерия подобия: число Рейнольдса и число Струхаля S [2, с. 89]

$$S = \frac{V_0 \tau}{L_0}.$$

В случае учета силы тяжести используется такой критерий подобия, как число Фруда, в сжимаемой жидкости появляется еще один критерий подобия — число Маха и т. д. (см. [6, с. 165]).

ВЫВОДЫ

В настоящей работе для преодоления вычислительных трудностей было рассмотрено моделирование методом подобия исходной физической модели течения вязкой сжимаемой жидкости в капилляре моделью, позволяющей избежать этих трудностей. Для этого рассмотрена возможность сведения общего уравнения Навье—Стокса к уравнению для вязкой несжимаемой жидкости. Было проведено упрощенное моделирование с одним безразмерным критерием подобия — числом Рейнольдса. Рассмотрены детали моделирования. Приведены другие возможные для исходной модели безразмерные критерии подобия.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Седов Л.И.* Методы подобия и размерности в механике. М.: Наука, 1972. 440 с.
2. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теоретическая физика. Т. 6. Гидродинамика. М.: Наука, 1988. 736 с.
3. *Серрин Дж.* Математические основы классической механики жидкости. М.: Иностр. литература, 1963. 256 с.
4. *Bruus H.* Theoretical microfluidics. Oxford: University Press, 2008. 346 p.
5. *Бэтчелор Дж.* Введение в динамику жидкости. М.: Мир, 1973. 759 с.
6. *Бреховских Л.М., Гончаров В.В.* Введение в механику сплошных сред. М.: Наука, 1982. 336 с.

Институт аналитического приборостроения РАН, г. Санкт-Петербург

Контакты: *Шарфарец Борис Пинкусович*, sharb@mail.ru

Материал поступил в редакцию 25.06.2013

SOME PARTICULAR QUALITIES OF SIMULATION FOR MICROFLUIDIC PROCESSES

B. P. Sharfarets, E. B. Sharfarets

Institute for Analytical Instrumentation of RAS, Saint-Petersburg

By way of overcoming of computational difficulties the substitution by means of the similarity method of the original physical problem for flowing of the compressible viscous fluid in capillary by the model, permissive to elude these difficulties. The naïve simulation with one dimensionless similarity criterion — Reynolds number is hereafter used. The details of simulation are considered.

Keywords: theory of similarity, Reynolds number, Navier—Stokes equation, incompressible viscous fluid